ОРДЕНА ЛЕНИНА ИНСТИТУТ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ
АКАДЕМИИ НАУК СССР

Молчанов А.М.

ТЕОРЕМА ВЫРАВНИВАНИЯ И ФОРМУЛА БОЛЬЦМАНА "ЗАКОН" ВОЗРАСТАНИЯ ЭНТРОПИИ

(Препринт)

г.Москва, 1968 г.

Теорема выравнивания и формула Больцмана "Закон" возрастания энтропии

Изучается математическая ситуация, типичная для массовых явлений любой природы. Показана возможность аксиоматического построения теории. Идея такого построения восходит к лекциям, прочитанным А.Я.Хинчиным в весеннем семестре 1950 г. на механико-математическом факультете МГУ.

п.I. Система и структурная функция

Аксиоматический подход основан на выделении главного понятия теории массовых явлений – понятия системы. Определение системы включает задание фазового пространства X, интегрирования по этому пространству, задаваемого неотрицательной (возможно дискретной) мерой dX и скалярной[x] функции $H(X)$. Удобно обозначение.

$$S=\{X, dX, H(X)\} \qquad (1)$$

явно указывающее на каждый из трех аспектов задания системы.

Важную роль в построении теории играет понятие структурной функции системы $\Omega(\mathcal{E})$. Эта функция задается следующим образом.

Рассмотрим пространство $\mathcal{D}$ бесконечно-дифференцируемых функций $f(\mathcal{E})$, заданных на прямой $-\infty<\mathcal{E}<+\infty$

---

x / В частности, в обычной термодинамике $H(X)$ – это энергия, точнее гамильтониан.

Формула

$$(\Omega, f) = \int_{-\infty}^{+\infty} \Omega(\varepsilon) f(\varepsilon) d\varepsilon = \int_X f[H(X)] dX \qquad (2)$$

определяет обобщенную, вообще говоря, функцию одного переменного ε, которая и называется структурной функцией системы.

п.2. Объединение систем и компоненты

Любые две системы S_1 и S_2 порождают третью систему S,

$$S = (S_1, S_2) = S_1 + S_2 \qquad (3)$$

объединение систем S_1 и S_2, причем $X, dX, H(X)$ строятся по соответствующим аспектам подсистем следующим образом. Пространство X есть прямое произведение:

$$X = (X_1, X_2) \qquad (4)$$

Мера dX есть прямое произведение мер dX_1 и dX_2

$$dX = dX_1 \, dX_2 \qquad (5)$$

Функция H есть сумма функций H_1 и H_2

$$H(X) = H_1(X_1) + H_2(X_2) \qquad (6)$$

Системы S_1 и S_2 называются в этом случае компонентами системы S. Обобщение на случай нескольких компонент очевидно.

Вычисление для системы S значения функционала $\Omega(\varepsilon)$,

$$(\Omega, f) = \int_X f(H) dX = \iint_{X_1 X_2} f(H_1 + H_2) dX_1 \, dX_2 =$$

$$= \iint_{-\infty}^{+\infty} f(\varepsilon_1 + \varepsilon_2) \Omega_1(\varepsilon_1) \Omega_2(\varepsilon_2) d\varepsilon_1 \, d\varepsilon_2,$$

непосредственно из определения (I) свертки обобщенных функций приводит к Теореме о свертке структурных функций компонент

$$\Omega(E) = \int_{-\infty}^{\infty} \Omega_1(E_1) \Omega_2(E - E_1) dE_1 \qquad (7)$$

п.3. Характеристическая функция системы

Всюду в дальнейшем предполагается, что в пространство $\mathcal{D}$

входят все комплексозначные функции, убивающие при $E \to \infty$ быстрее экспоненты. В приложениях это условие обычно выполнено, так как функция $H(X)$ чаще всего ограничена снизу и растет степенным образом при $|X| \to \infty$. В этом случае преобразование Лапласа структурной функции является настоящей (а не обобщенной) функцией и может быть записано в двух эквивалентных формах:

$$\Phi(\beta) = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\beta E}\,\Omega(E)\,dE = \int_X e^{-\beta H(X)}\,dX \qquad (8)$$

Функция $\Phi(\beta)$ называется <u>характеристической функцией</u> системы и обладает следующими замечательными свойствами:

I. $\Phi(\beta)$ аналитична в полуплоскости $Re\,\beta > 0$

2. $\Phi(\beta)$ монотонно убывает вдоль действительной оси β

3. $|\Phi(\beta)| \leq \Phi(Re\,\beta)$

4. $\Phi(\beta)$ логарифмически выпукла на действительной оси β .

Докажем последнее свойство. Вычисление второй производной от $\ln\Phi$ дает

$$\frac{d^2\ln\Phi}{d\beta^2} = \frac{1}{\Phi^2}\left[\Phi\,\frac{d^2\Phi}{d\beta^2} - \left(\frac{d\Phi}{d\beta}\right)^2\right]$$

Первое слагаемое, стоящее в квадратных скобках может быть записано в виде двойного интеграла, получающегося при умножении однократных:

$$\Phi\,\frac{d^2\Phi}{d\beta^2} = \int_X\int_Y H^2(Y)\,e^{-\beta[H(X)+H(Y)]}\,dX\,dY\ .$$

Так как величина интеграла не зависит от обозначения переменных интегрирования, то выражение для $\Phi\Phi''$ можно записать в симметризованной форме:

$$\Phi\Phi'' = \frac{1}{2}\iint\limits_{X\,Y}\left[H^2(X)+H^2(Y)\right]e^{-\beta[H(X)+H(Y)]}dX\,dY$$

Подставляя аналогичное выражение для $(\Phi')^2$ получаем окончательную формулу,

$$\frac{d^2\ln\Phi}{d\beta^2} = \frac{1}{2\Phi^2}\iint\limits_{X\,Y}\left[H(X)-H(Y)\right]^2 e^{-\beta[H(X)+H(Y)]}dX\,dY \geq 0, \qquad (9)$$

из которой очевидна неотрицательность второй производной $\ln\Phi$ и, следовательно, выпуклость этой функции.

Особенно наглядно удобство для приложений использования функции Φ вместо Ω демонстрирует

Теорема о произведении характеристических функций.

Характеристическая функция $\Phi(\beta)$ системы равна произведению характеристических функций компонент:

$$\Phi(\beta) = \Phi_1(\beta)\,\Phi_2(\beta) \qquad (10)$$

Доказательство непосредственно вытекает из определения компонент – (3),(4),(5),(6) – и определения (8) характеристической функции

$$\Phi(\beta) = \int\limits_X e^{-\beta H(X)}dX = \iint\limits_{X_1X_2} e^{-\beta H_1-\beta H_2}dX_1\,dX_2 =$$

$$= \int\limits_{X_1} e^{-\beta H_1(X_1)}dX_1\int\limits_{X_2} e^{-\beta H_2(X_2)}dX_2 = \Phi_1(\beta)\Phi_2(\beta).$$

п.4. Формула обращения для структурной функции

Как уже было сказано выше, в отличие от обобщенной функции $\Omega(\mathcal{E})$, характеристическая функция $\Phi(\beta)$ является настоящей, да к тому же еще аналитической функцией своего аргумента. Вместе с тем задание $\Phi(\beta)$ эквивалентно заданию $\Omega(\mathcal{E})$, так как функцию $\Omega(\mathcal{E})$ можно восстановить (2) по $\Phi(\beta)$, использовав формулу обращения преобразования Лапласа:

$$\Omega(\varepsilon) = \frac{1}{2\pi i} \int\limits_{\Gamma} e^{\beta\varepsilon} \Phi(\beta)\, d\beta \qquad (11)$$

В этой формуле путь интегрирования Γ может быть выбран, в силу независимости интеграла от пути. произвольно в правой полуплоскости, лишь бы он асимптотически выходил на прямую, параллельную мнимой оси. Наиболее удобно выбирать такую прямую, вдоль которой подинтегральное выражение имеет минимальную величину, ибо в этом случае сводятся к минимуму интерференционные явления, сильно затрудняющие (теоретическое или фактическое) вычисление интеграла. В этом преодолении интерференции и состоит, собственно, основная идея метода перевала[3]. Третье из свойств функции $\Phi(\beta)$ показывает, что минимум следует искать на действительной оси.

Логарифм подинтегральной функции в формуле (II) есть функция двух переменных

$$\Psi(\beta, \varepsilon) = \beta\varepsilon + \ln\Phi(\beta) \qquad (12)$$

растущая как при $\beta \to \infty$ (потому что тогда растет первое слагаемое, а второе убывает) так и при $\beta \to 0$ (когда слагаемые меняются ролями). Так как, кроме того Ψ линейным слагаемым отличается от выпуклой (в силу (9)) функции $\ln\Phi(\beta)$, то и сама функция Ψ выпуклая функция. Поэтому при каждом значении ε существует и притом единственная точка β ,в которой достигается минимум функции Ψ :

$$S(\varepsilon) = \min_{\beta}(\beta\varepsilon + \ln\Phi) = \min_{\beta} \Psi(\beta, \varepsilon) \qquad (13)$$

Точка β может быть найдена из уравнения

$$\frac{d\ln\Phi}{d\beta} = -\varepsilon, \qquad (14)$$

получающегося приравнением нулю производной Ψ по β. Именно в этой точке вертикальная прямая Γ в комплексной плоскости β дает наилучший путь интегрирования для вычисления $\Omega(\mathcal{E})$. Значение S в этой точке удобно выразить через параметр β.

$$S = \ln \Phi - \beta \frac{d \ln \Phi}{d\beta} \qquad (15)$$

Формулы (I4) и (I5) подсказывают целесообразность введения параметра β в качестве основного переменного, ибо остальные величины хорошо выражаются именно через β.

п.5. Теорема выравнивания. Интенсивность и экстенсивность.

Функция $\Psi(\beta,\mathcal{E})$ является, подобно $H(X)$, аддитивной функцией системы в том смысле, что при объединении компонент S_1 и S_2 в новую систему S функции Ψ_1 и Ψ_2 складываются:

$$\Psi(\beta,\mathcal{E}) = \Psi_1(\beta,\mathcal{E}_1) + \Psi_2(\beta,\mathcal{E}_2) \qquad (16)$$

Это свойство вытекает из аддитивности H и мультипликативности характеристической функции $\Phi(\beta)$.

Из выпуклости функций Ψ_1, Ψ_2 и Ψ вытекает замечательная[4]

Теорема выравнивания ("закон" "возрастания" энтропии)

$$S \geq S_1 + S_2 ; \qquad \beta_1 \leq \beta \leq \beta_2 \qquad (17)$$

Доказательство получается немедленно из определения S_1 и S_2:

$$\Psi_1(\beta,\mathcal{E}_1) \geq \Psi_1(\beta_1,\mathcal{E}_1) = \min_{\beta} \Psi_1(\beta,\mathcal{E}_1) = S_1 \qquad (18)$$

$$\Psi_2(\beta,\mathcal{E}_2) \geq \Psi_2(\beta_2,\mathcal{E}_2) = \min_{\beta} \Psi_2(\beta,\mathcal{E}_2) = S_2 \qquad (19)$$

Поэтому при всех значениях β имеет место неравенство

$$\Psi(\beta,\mathcal{E}) \geq \Psi_1(\beta_1,\mathcal{E}_1) + \Psi_2(\beta_2,\mathcal{E}_2) \qquad (20)$$

из которого, в частности, в точке β минимума Ψ и вытекает требуемое неравенство $S \geq S_1 + S_2$.

Кроме неравенства для "экстенсивностей"[x/] из неравенства (20) следует также (в силу выпуклости ψ_1 , ψ_2 и ψ) двойственное неравенство,

$$\beta_1 \leq \beta \leq \beta_2 ,$$

смысл которого состоит в том, что параметр β объединенной системы расположен между[xx/] параметрами компонент. Это обстоятельство выясняет важнейшую роль параметра β , который можно, следовательно, считать мерой интенсивности, в противоположность экстенсивному параметру S .

Равенство (предельный случай неравенства экстенсивностей)

$$S = S_1 + S_2 \qquad (22)$$

(как это опять-таки вытекает из неравенства для функций ψ) имеет место тогда и только тогда, когда

$$\beta_1 = \beta_2 = \beta_3 \qquad (23)$$

Иными словами аддитивность является предельным случаем экстенсивности, достигаемым только при равенстве интенсивностей. Отсюда вытекает, что параметр β задает также условие равновесия компонент (по отношению к объединению, смешиванию)

После сказаного неудивительно, что в обычной термодинамике β совпадает с обратной температурой (в единицах k), а S есть энтропия.

Появление аналогичных величин в теории передачи сообщений , (теория "информации") означает совпадение математического аппарата, что и является, в сущности, главной темой статьи.

---

x/ ex - не только "внешний", но и "вне".

xx/ in "внутри"

Иногда [5] из совпадения формул заключают о совпадении физической природы объектов теорий. Такой вывод неправомерен. Плодотворность аксиоматического метода основана именно на одинаковости кинетики (или статики) объектов, имеющих совершенно разную физическую природу, что и позволяет изучать их поведение абстрактно. Так, например, поведение физического маятника и колебательного контура в радиотехнике (а также некоторых экологических систем) описывается одним и тем же уравнением, но было бы странно заключать отсюда об одинаковости физической сущности явлений. Противоположная крайность[6] приводит к бесполезному противопоставлению функции $H(X)$, взятой из химической кинетики, совершенно аналогичной функции $H(X)$, но взятой из механики. Предлагаемая статья содержит попытку найти разумную среднюю линию, основанную на аксиоматическом подходе, учитывающему самым внимательным образом свойства системы, но целиком пренебрегающем происхождением этой системы.

п.6. Атомистичность

Идея атомистичности - одно из самых древних научных завоеваний. Ее первоначальной формой является представление о неделимости, неразложимости элементов, из которых состоит "все сущее". Однако развитие этой идеи все более проясняет решающую роль двух других аспектов идеи атомистичности -массовости и одинаковости (похожести) элементов, составляющих изучаемую систему. Суть дела не в том,что элемент (компонента, "атом", частица) бесструктурен, а в том,что его структура почти несущественна для свойств большой системы. Элементов очень много и строение (или функционирование) полной системы определяются не деталями структуры элементов, а основными, грубыми их свойствами. Элементарная модель твердых шариков и утонченная схема квантовой физики в равной мере приводят к закону Бойля-Мариотта для разреженных газов.

Общие утверждения, высказанные в предыдущих параграфах, справедливы для произвольных систем. Однако, именно в силу всеобщности они не очень содержательны и носят скорее качественный, нежели количественный характер.

Точные утверждения, являющиеся основой многих количественных закономерностей, можно установить, сконцентрировав внимание на свойствах больших систем. Математическая идеализация состоит в предельном переходе $\frac{1}{n} \to 0$ и установлении вытекающих из него предельных соотношений.

Обычно для получения результата вводится, кроме $\frac{1}{n}$, еще какой-нибудь малый параметр. В работе (7), например, это малая плотность. В настоящей работе предпринята попытка обойтись без дополнительных гипотез, используя только один малый параметр, $\delta = \frac{1}{n}$. Разложение по степеням этого малого параметра приводит к иерархии структурных свойств компонент, составляющих изучаемую систему. Нечто похожее происходит, например, в электростатике. На больших расстояниях даже очень сложная система зарядов может быть с успехом заменена точечным зарядом. При уточнении (особенно если полный заряд равен нулю) необходим уже учет структуры, но сначала лишь в форме введения эквивалентного диполя. Дальнейшие уточнения приводят к идее мультиполей.

п.7. Формула Больцмана

Из теоремы, сформулированной в конце п.3, нетрудно получить формулу для характеристической функции большой системы:

$$\Phi_n(\beta)=\left[\varphi(\beta)\right]^n \tag{24}$$

Главная особенность этой формулы - превращение[x/] аморфного индекса „n" в левой части (имеющего скорее порядковый характер), в количественный показатель степени справа, приобретающий уже алгоритмически точный смысл.

Выпишем формулу для структурной функции,

$$\Omega_n(\mathcal{E})=\frac{1}{2\pi i}\int\limits_{\Gamma} e^{z\mathcal{E}+n\ln\varphi(z)}\,dz\ , \tag{25}$$

где обозначение z должно подчеркнуть, что путь интегрирования лежит в комплексной области. Лапласу принадлежит идея интегрировать вдоль такой прямой Γ_β (параллельной мнимой оси),

$$z=\beta+i\zeta \tag{26}$$

которая пересекает действительную ось в точке β, в которой подинтегральная функция имеет минимум (метод перевала). Ясно, что при разных $\mathcal{E}$ прямую Γ придется проводить через различные точки β, определяемые уравнением

$$n\frac{d\ln\varphi}{d\beta}+\mathcal{E}=0 \tag{27}$$

---

x/ Сейчас это "очевидно" - через полтора века (1812) после первых работ Лапласа, полвека (1901) после теоремы Ляпунова и четверть века (1943) после книги Хинчина. Да и так ли уж до конца здесь все ясно?

Существенным развитием этой мысли является предложение[x] именно β считать независимым переменным, а $\mathcal{E}$ рассматривать как функцию β. Выше мы уже видели (15), что и экстенсивность S весьма просто выражается через β:

$$S = n\left[\ln\varphi(\beta) - \frac{d\ln\varphi}{d\beta}\cdot\beta\right] . \qquad (28)$$

Наша ближайшая задача – найти выражение через n и β для структурной функции большой системы.

Подинтегральная функция имеет максимум[xx] как раз в точке β (конечно, для $\mathcal{E}$, задаваемого формулой (27)) и максимум этот равен e^S, где S – экстенсивность, вычисляемая при заданном β по формуле (28). Вынесение экспоненциального множителя за знак интеграла

$$\Omega_n(\beta) = e^{S_n(\beta)} J_n(\beta) \qquad (29)$$

сводит задачу вычисления структурной функции к вычислению интеграла $J_n(\beta)$, под знаком которого стоит функция, модуль которой всюду меньше единицы (кроме $z=\beta$, где эта функция как раз равна единице).

---

x/ В книге Хинчина эта мысль четко сформулирована, но восходит она, если не к Лапласу, то уж к Больцману или Гиббсу, наверное.

xx/ При движении вдоль Γ и, наоборот, минимум при движении вдоль действительной оси. В этом, конечно, суть перевальной точки.

Так же как и $\Omega_n(\mathcal{E})$, новая функция $J_n(\mathcal{E})$ является, вообще говоря, обобщенной функцией своего аргумента β. Однако в классическом случае статистической механики обе они настоящие функции и соотношение (29) можно прологарифмировать:

$$\ln \Omega_n = S_n + \ln J_n \tag{30}$$

Ниже будет показано, что величина J_n всегда имеет степенной порядок по n. Поэтому $\ln J_n$ величина порядка $\ln n$, в то время как S_n пропорционально n.

Отбрасывание[x] $\ln J_n$ приводит к знаменитой формуле Больцмана

$$S \approx \ln \Omega \tag{31}$$

Естественно сохранить название формула Больцмана и для более общего случая. Однако распространение формулы Больцмана на случай произвольных систем возможно только в форме (29), но не в форме (30), так как понятие логарифма обобщенной функции не определено.

Поэтому все дальнейшие вычисления сводятся к установлению асимптотики интеграла $J_n(\beta)$. Удобно сохранить для $J_n(\beta)$ термин "предэкспонента" (широко распространенный в физике) независимо от того "до или после" Больцмановской экспоненты написан этот множитель.

Весьма любопытно "распределение обязанностей" между экспонентой и предэкспонентой. Количественной стороной величины Ω_n "заведует" экспонента, являющаяся настоящей, а не обоб-

x/ Это пренебрежение особенно убедительно в кинетической теории газов, когда число частиц n имеет порядок 10^{19} на кубический сантиметр.

щенной функцией β (или $\mathcal{E}$ - это все равно). Более того, эта функция даже аналитична в некоторой полуплоскости, лежащей правее мнимой оси в комплексной плоскости β. Предэкспонента, наоборот, почти не оказывает влияния на Ω_n в количественном отношении, но зато именно в ней сосредоточены все особенности (слагаемые типа δ-функция Дирака) определяющие принадлежность $\Omega_n(\beta)$ к определенному классу обобщенных функций.

п.8. Асимптотика предэкспоненты

Выражение для предэкспоненты имеет вид:

$$J_n(\beta)=\frac{1}{2\pi i}\int\limits_{\Gamma} e^{n\sigma(z,\beta)}\,dz \qquad (32)$$

где функция $\sigma(z,\beta)$ выражается через логарифм характеристической функции одной компоненты

$$\psi(\beta)=\ln\varphi(\beta) \qquad (33)$$

весьма любопытной формулой (заставляющей вспомнить преобразование Лежандра):

$$\sigma(z,\beta)=\psi(z)-\psi(\beta)-\psi'(\beta)(z-\beta)$$

Эта функция переменной z по самому своему происхождению устроена так, что при $z=\beta$, она обращается в нуль вместе со своей первой производной. Так как она аналитична по z, то ее можно разложить в ряд по степеням $(z-\beta)$. Этот ряд начинается, конечно, с члена второго порядка по $(z-\beta)$

$$\sigma(z,\beta)=\sum_{k=2}^{\infty}\frac{\psi^{k}(\beta)}{k!}(z-\beta)^{k} \qquad (35)$$

Самое нетривиальное соображение, определяющее весь ход дальнейших выкладок - понимание решающей роли квадратичного члена в разложении функции $\sigma(z,\beta)$. Это и есть основная идеи Лапласа – идеи метода перевала.

Выявление механизма, создающего асимптотическое разложение, основано на выборе правильной переменной интегрирования вдоль пути Γ. Вместо комплексного переменного вводится новое, действительное переменное τ:

$$z = \beta + \frac{i\tau}{\sqrt{n}}$$

Суть дела именно в множителе $\frac{1}{\sqrt{n}}$. Он выбран как раз так, чтобы главный член в показателе (квадратичный, как мы предполагаем) не содержал n. Именно это соображение определяет масштаб переменной интегрирования. Наши ожидания оправдываются, ибо разложение $n\sigma$ приобретает вид:

$$n\sigma = -\frac{a^2\tau^2}{2} + \sum \left(\frac{i}{\sqrt{n}}\right)^k a_k \tag{37}$$

и, следовательно, все члены, кроме главного, стремятся к нулю при $n \to \infty$.

Для отчетливого выявления главной идеи в формуле (37) краткими символами a_k обозначены весьма непростые функции трех переменных – индекса k, переменной интегрирования τ и параметра β:

$$a_k = -\frac{\Psi^{(k+2)}(\beta)}{(k+2)!}(\tau)^{k+2} \tag{38}$$

Главное слагаемое также может быть получено отсюда при $k=0$. Однако для того, чтобы подчеркнуть его роль и, особенно, важный в дальнейшем факт существенной отрицательности этого члена, введено специальное обозначение:

$$\Psi''(\beta) = a^2, \tag{39}$$

____

право на которое дает выпуклость функции $\Psi(\beta)$.

В результате под знаком интеграла возникает множитель $e^{-\frac{a^2\tau^2}{2}}$, быстро стремящийся к нулю при $|\tau| \to \infty$. Это означает, что основной вклад в величину интеграла дает конечный интервал изменения τ и, следовательно, ничтожно[x] малый (порядка $\frac{1}{\sqrt{n}}$) отрезок пути Γ в плоскости Z.

Главное же сделано, выяснена идейная сторона задачи, остается только техническая стадия, довольно, впрочем, громоздкая.

Бесконечный ряд в $n\sigma$ порождает под знаком интеграла бесконечное произведение A:

$$A(\tau,\beta,n)=\prod_{k=1}^{\infty} e^{a_k\left(\frac{i}{\sqrt{n}}\right)^k}, \tag{40}$$

которое нужно преобразовать в бесконечную сумму:

$$A=1+\sum_{k=1}^{\infty}\left(\frac{i}{\sqrt{n}}\right)^k A_k(\beta,\tau), \tag{41}$$

подставить эту сумму в формулу для предэкспоненты и почленно проинтегрировать. Получится искомое разложение предэкспоненты в ряд по обратным степеням $\sqrt{n}$:

$$J_n(\beta)=\frac{1}{2\pi\sqrt{n}}\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{a^2\tau^2}{2}}d\tau\left[1+\sum_{m=1}^{\infty}\left(\frac{i}{\sqrt{n}}\right)^m\frac{\int_{-\infty}^{+\infty}A_m(\beta,\tau)e^{-\frac{a^2\tau^2}{2}}d\tau}{\int_{-\infty}^{+\infty}e^{-\frac{a^2\tau^2}{2}}d\tau}\right] \tag{42}$$

Интегралы, входящие в эту формулу нетрудно вычислить, так как коэффициенты A_m являются многочленами от τ. Дело сводится, поэтому, к отысканию интегралов вида:

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\tau^{2q}e^{-\frac{a^2\tau^2}{2}}d\tau=\frac{1}{a^{2q+1}}\,\frac{(2q)!}{2^q q!}\cdot\sqrt{2\pi} \tag{43}$$

---

x/ В обычной термодинамике 10^{-9}.

Если же под знаком интеграла стоит нечетный множитель τ^{2q+1}, то интеграл просто равен нулю.

Самая громоздкая часть вычислений – это выражение коэффициентов A_m через величины a_k. Прямое разложение показательной функции приводит к результату:

$$A_m = \sum_{\ell=1}^{m} \frac{1}{\ell!} \sum_{k_1+\ldots+k_\ell = m} \ldots \sum a_{k_1} \ldots a_{k_\ell} . \tag{44}$$

Подстановка выражений для a_k дает:

$$A_m(\tau,\beta) = \sum_{\ell=1}^{m} \frac{\tau^{m+2\ell}}{\ell!} (-1)^\ell \sum_{k_1+\ldots+k_\ell=m} \ldots \sum \frac{\psi^{(k_1+2)} \ldots \psi^{(k_\ell+2)}}{(k_1+2)! \ldots (k_\ell+2)!} \tag{45}$$

Из этой формулы видно, что все нечетные члены в (42) обращаются при интегрировании в ноль. Поэтому разложение $J_n(\beta)$ содержит только четные $m = 2p$ и, следовательно, действительные члены и происходит по целым (не считая общего множителя $\frac{1}{\sqrt{n}}$) степеням $\frac{1}{n}$

$$J_n(\beta) = \frac{1}{\sqrt{2\pi n}\, a(\beta)} \left[1 + \sum_{p=1}^{\infty} \frac{(-1)^p}{n^p} K_p(\beta) \right], \tag{46}$$

В этой асимптотической формуле коэффициенты $K_p(\beta)$ весьма громоздким образом выражаются через производные только одной функции β, а именно $\psi(\beta) = \ln \varphi(\beta)$. Эти выражения имеют следующий вид

$$K_p(\beta) = \sum_{\ell=1}^{2p} \frac{(-1)^\ell}{a^{2p+2\ell+1}\, 2^{p+\ell} (p+\ell)!\, \ell!} \sum_{\substack{r_1+\ldots+r_\ell = 2p+2\ell \\ r_i \geq 2}} \ldots \sum \frac{(r_1+\ldots+r_\ell)!}{r_1! \ldots r_\ell!} \psi^{(r_1)} \ldots \psi^{(r_\ell)} \tag{47}$$

Обычно бывает достаточно первых двух членов разложения $J_n(\beta)$

$$J_n(\beta)=\frac{1}{\sqrt{2\pi n}\,a(\beta)}\left\{1+\frac{1}{24n}\left[3\,\frac{\psi^{IV}}{a^5}-5\,\frac{(\psi''')^2}{a^7}\right]+O\left(\frac{1}{n^2}\right)\right\}, \quad (48)$$

которые, впрочем, можно получить значительно проще (минуя со... щие выкладки) прямо из формулы (32).

Найденные разложения дают асимптотику структурной функции

$$\Omega_n(\mathcal{E})=\frac{e^{n\left(\ln\varphi-\frac{d\ln\varphi}{d\beta}\cdot\beta\right)}}{\sqrt{2\pi n(\ln\varphi)''}}\left\{1+\frac{1}{24n}\left[3\frac{\psi^{IV}}{a^5}-5\frac{(\psi''')^2}{a^7}\right]+O\left(\frac{1}{n^2}\right)\right\}, \quad (49)$$

которая может быть, конечно, продолжена до полного ряда. Но так как члены этого ряда получаются друг из друга сложным алгоритмом, содержащим операции дифференцирования то, вообще говоря, нет ни малейшей надежды получить сходящийся ряд.

Однако, функция Ω нигде не входит, если можно так выразиться, в "одиночестве". Всюду в теории она входит как весовой множитель при интегрировании какой-нибудь другой функции. Это обстоятельство позволяет применить к задаче современную точку зрения теории обобщенных функций, главная идея которой состоит в том, что подбором надлежащего пространства $\mathfrak{h}$ можно ряду (49) придать точный смысл сходящегося ряда, если рассматривать его члены (аналитические, к слову сказать, функции) как функционалы над векторами пространства $\mathfrak{h}$. Детали построения этого пространства $\mathfrak{h}$ нас сейчас не интересуют(1).

п.9. <u>Интенсивность β, как независимое переменное.</u>

Внутренняя логика разбираемой схемы подсказывает, что именно β удобнее всего выбрать в качестве основного переменного.

Соберем воедино, с этой точки зрения, все основные формулы. Первый шаг состоит в вычислении характеристической функции ("статистическая сумма")

$$\varphi(\beta)=\int_X e^{-\beta H(x)}dx \tag{50}$$

Следует отметить, что именно в этот момент происходит "обезличка" системы. Пространство X могло иметь самую разную природу. Оно могло быть фазовым пространством механической системы или химическим концентрационным пространством или пространством численностей в экологических задачах. Его геометрия могла быть довольно прихотливой, например тор, или дискретный набор точек, или бесконечномерное пространство. Функция $H(X)$ могла иметь какую угодно размерность (энергия или число букв) и любые поверхности уровня, в том числе состоящие из нескольких компонент.

При переходе к $\varphi(\beta)$ все эти индивидуальные различия полностью стираются - любая система заменяется эквивалентной одномерной системой, которой однозначно задается структурной функцией. Было бы, однако, неоправданной односторонностью считать энергетические системы образцом строения.

Следующий шаг - отыскание зависимости $\mathcal{E}$ от β. Раньше мы решали уравнение относительно β и отыскивали β в функции $\mathcal{E}$. Теперь мы интерпретируем соотношение

$$\frac{\mathcal{E}}{n} = \varepsilon = \cdot \frac{d \ln \varphi}{d\beta} \qquad (51)$$

как задание ε в виде функции от β. Поучительно, что в термодинамике это соотношение есть уравнение состояния (в энергетической форме).

Наконец основной результат -абстрактный аналог формулы Больцмана - асимптотика структурной функции также получает наиболее удобную форму в переменной β

$$\Omega_n(\mathcal{E}) = e^{S(\beta)} \frac{1}{\sqrt{2\pi n}\, a(\beta)} \left\{ 1 + \frac{1}{24n}\left[3\frac{\varphi^{IV}}{a^5} - 5\frac{(\varphi''')^2}{a^7} \right] + \cdots \right\}; \qquad (52)$$

где величина S имеет вид

$$\frac{S}{n} = \ln\varphi - \frac{d\ln\varphi}{d\beta}\beta \qquad (53)$$

Полезной часто оказывается и "энергетическая", не-Больцмановская форма асимптотики, в которой β и $\mathcal{E}$ входят на равных правах, как сопряженные величины:

$$\Omega_n(\mathcal{E}) = \frac{e^{\beta\mathcal{E}}}{[\varphi(\beta)]^n} \cdot \frac{1}{\sqrt{2\pi n}\, a(\beta)} \left\{ 1 + O\left(\frac{1}{n}\right) \right\} \qquad (54)$$

В последние формулы поправочный, "предэкспоненциальный" множитель содержит функцию $a(\beta)$, которая выражается через $\varphi(\beta)$ весьма просто

$$a^2(\beta) = \frac{d^2 \ln\varphi}{d\beta^2} > 0 \qquad (55)$$

В заключение полезно отметить еще одно любопытное обстоятельство. В частном случае термодинамики (разбирая для определенности пример идеального газа) можно установить следующую простую связь между интенсивностью β и температурой T :

$$\beta = \frac{1}{kT} \qquad (56)$$

Ландау [8] отмечает, что существуют ситуации, в которых имеют смысл отрицательные температуры. Он получает, после некоторых специальных рассмотрений, что отрицательные температуры "лежат выше" положительных. Этот результат вытекает из формулы (56), если считать системы упорядоченными всегда в порядке убывания параметра β. Это означает, возможно, что параметр β имеет более общее и глубокое значение, нежели его частный случай – температура.

Литература

I. Гельфанд И.М. и Шилов Г.Е. Обобщенные функции и действия над ними. М. 1958.

2. Гельфанд И.М. и Шилов Г.Е. Пространства основных обобщенных функций М.1958.

3. Евграфов М.А. Асимптотические оценки и целые функции. М. 1962.

4. Хинчин А.Я. Математические основания статистической механики, Гостехиздат. Москва 1943.

5. Бриллюэн, Леон. Наука и теория информации М.1960

6. Goodvin B.C. Temporal organization in cells. London,1963.

7. Боголюбов Н.Н. О некоторых статистических методах в математической физике. Львов 1945 г.

8. Ландау Л.Д. и Лифшиц Е.М. Статистическая физика Москва 1951 стр.237.

Т 17558 от 30 XII 1968 г. Заказ № 2 Тираж 100

Институт прикладной математики

Москва, Миусская пл., 4